

# Moléculas e superfícies



Do meio ambiente à neurobiologia, passando pela corrosão de metais, a física de moléculas e superfícies vai cada vez mais fundo para revelar numerosos fenômenos de natureza básica e de aplicação tecnológica.

**Água, gases** e outros complexos podem produzir importantes reações químicas nas superfícies, por exemplo, de óxidos, metais e ligas. O modo como essas substâncias interagem, bem como as conseqüentes alterações superficiais, têm interesse para diversas áreas interdisciplinares.

Assim, a meta do cientista que se dedica ao estudo interdisciplinar da física, química, biologia e engenharia de moléculas e superfícies é desenvolver uma compreensão capaz de prever e entender várias propriedades dessa interação, para obter controle sobre numerosos fenômenos de importância tecnológica, como monitoramento e controle de poluição ambiental; corrosão de superfícies metálicas; estabilidade das interfaces em materiais usados para armazenar combustíveis; destruição pela ação da luz de materiais que causam poluição de águas; eliminação de perigosos poluentes atmosféricos, industriais e orgânicos.

A partir da década de 1990, com o avanço das técnicas computacionais, os modelos teóricos começaram a ser usados para melhorar nossa compreensão das superfícies e de fenômenos que envolvem seu estudo. A comunicação de dados através de redes de computadores também permitiu a modernização do funcionamento de vários grupos de pesquisa no mundo. Para desenvolver pesqui-

sas em níveis internacionais, o Grupo de Moléculas e Superfícies do CBPF utiliza computadores potentes e velozes – as chamadas estações de trabalho – e programas de ponta.

Neste artigo, o leitor vai conhecer algumas das áreas em que o nosso grupo tem desenvolvido suas pesquisas e dado contribuições (ver 'Grupo faz parte de programa de excelência'). Começaremos pelos inumeráveis compostos formados pelo elemento químico carbono, passando por plásticos que conduzem eletricidade e moléculas que carregam informação no cérebro, para chegar a um dos produtos mais importantes para a indústria química de hoje, os catalisadores.

**ÁLCOOL E BOLAS DE CARBONO.** A química orgânica destaca-se pelo número e pela complexidade das substâncias que o elemento carbono pode formar. Conhecem-se hoje cerca de 7 milhões desse compostos, contra aproximadamente 100 mil de todos os outros elementos. Assim, esse ramo da química

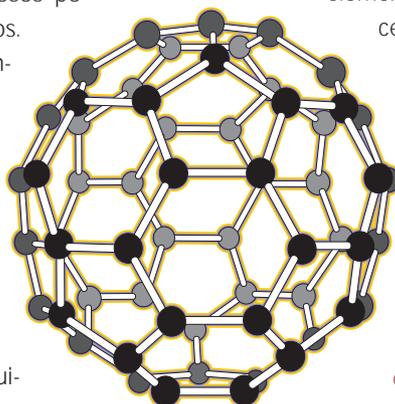


Figura 1. Esquema da buckybola mais comum, com 60 átomos de carbono, descoberta em 1985. Desde então, outras formas foram descobertas, e várias aplicações têm surgido para essa terceira forma do carbono na natureza – as outras duas formas são o grafite e o diamante.

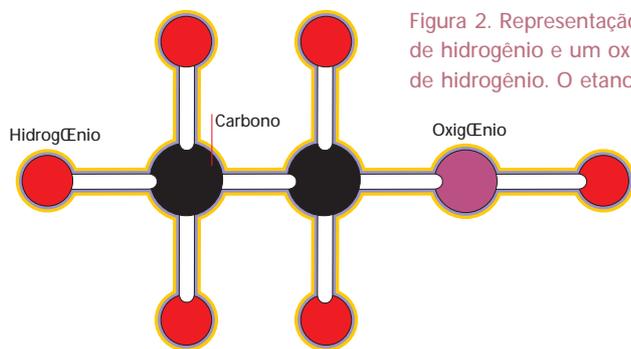


Figura 2. Representação da molécula de etanol, com um grupo hidroxila (um átomo de hidrogênio e um oxigênio) ligados a uma curta cadeia de dois átomos de carbono e cinco de hidrogênio. O etanol é o álcool presente em bebidas como vinho, cerveja e aguardentes.

ca é visto hoje mais como a química dos compostos de carbono, excluindo-se só compostos mais simples, como o gás dióxido de carbono e os carbonatos (mármore, calcário etc.).

Na natureza, o elemento carbono existe como grafite e diamante. Mas em 1985 cientistas descobriram uma terceira forma de carbono. Nela, os átomos se ligam em anéis, que formam várias moléculas curvas. O tipo mais comum dessas moléculas, com 60 átomos de carbono, foi apelidada buckybola, para a qual estão sendo descobertas várias aplicações (figura 1).

Entre os compostos orgânicos, talvez o álcool seja um dos mais populares e também um daqueles com maior número de aplicações industriais. Suas moléculas se caracterizam por ter pelo menos um grupo de hidroxila (um átomo de oxigênio ligado a outro de hidrogênio) diretamente unido a uma cadeia ou a um anel de átomos de carbono.

Usualmente, pensamos no álcool apenas como um ingrediente do vinho, da cerveja e das aguardentes. No entanto, o chamado etanol é apenas um dos tipos de alcoóis. Nele, o grupo hidroxila é unido a uma curta cadeia de dois átomos de carbono e cinco de hidrogênio (figura 2). Outros tipos de alcoóis são usados para produzir solventes, detergentes, perfumes, vernizes e anticongelantes.

**PLÁSTICOS E NEURÔNIOS.** Na química, usa-se a denominação polímero para indicar uma molécula orgânica gigante, formada pela união de várias moléculas menores e idênticas chamadas monômeros. A seda, a lã de carneiro e nossos cabelos são exemplos de polímeros.

Sempre aprendemos que os plásticos, o tipo de polímero artificial mais importante, não conduzem eletricidade (figura 3). Mas, sob certas circunstâncias – quando dopados com outras substâncias –, esses materiais podem se comportar como um metal. Essa descoberta foi tão importante que deu a três cientistas o prêmio Nobel de química em 2000.

Costumamos falar sobre a ‘revolução’ da Internet devido a centenas de milhões de usuários que se comunicam entre si ocasionalmente. Porém, isso não é nada comparado aos

## GRUPO FAZ PARTE DE PROGRAMA DE EXCELÊNCIA

Nesta últimas duas décadas, o Grupo Moléculas e Superfícies vem trabalhando intensamente para manter sua alta produtividade científica, considerada de nível internacional. Além de numerosos artigos publicados em revistas internacionais de prestígio, o grupo tem recebido com frequência convites para trabalhos de revisão, comunicações, palestras e participações em importantes congressos multidisciplinares nacionais e internacionais.

Na década de 1990, coordenamos o convênio de cooperação internacional Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq)/CBPF – *National Science Foundation* (Estados Unidos) e acabamos de publicar um capítulo em

um livro sobre a interação de moléculas com superfícies.

Fazemos parte do grupo de excelência Pronex 97 (núcleos de materiais cerâmicos para aplicações em eletrônica) e somos colaboradores externos do grupo de excelência Pronex 96 (modelagem e simulação molecular de propriedades físico-químicas). Além disso, somos membros colaboradores do Centro Multidisciplinar para o Desenvolvimento de Materiais Cerâmicos, um dos dez centros de excelência da Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo.

Temos orientado e co-orientado trabalhos de iniciação científica, mestrado, doutorado, assim como trabalhos de pesquisa de recém-doutores bolsistas do CNPq e da Fundação Carlos Chagas Fi-

lho de Amparo à Pesquisa do Estado do Rio de Janeiro (Faperj) que participam na elaboração de livros e trabalhos de revisão internacional.

Temos publicações recentes com pesquisadores da área de física, química, biologia e engenharia de vários institutos e estados brasileiros, incluindo centros de excelência e centros emergentes (UFSC, UFRJ, IME, UFMG, UFPE, UFF, UNB, UFBA, UFRGS, UEPG, Unicamp, UEG, UENF, USP, UFES, UEP, Tecnorite), além de publicações com pesquisadores de instituições internacionais.

Nossa captação de recursos vem da Faperj, do CNPq e do Pronex, bem como da Coordenação de Apoio a Pessoal de Ensino Superior (Capes) e da Financiadora de Estudos e Projetos (Finep).

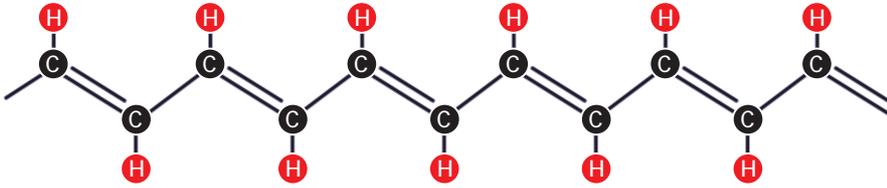


Figura 3. O plástico é o polímero artificial de maior aplicação. Sua molécula gigante é formada pela repetição de unidades menores, os monômeros. Em geral, plásticos são maus condutores de eletricidade, mas, quando dopados com outras substâncias, podem se assemelhar a metais na condução.

100 bilhões de neurônios (células nervosas) que carregamos e que se comunicam entre si continuamente na estrutura mais complexa que conhecemos: o cérebro

Mais especificamente, essa comunicação, cuja natureza é química, ocorre através de moléculas complexas chamadas neurotransmissores, que também são alvo de estudo multidisciplinar da área de moléculas e superfícies. Mais uma vez, a descoberta de mecanismos que envolvem a comunicação nervosa rendeu o Nobel de fisiologia e medicina.

**CERÂMICAS E ÁGUA NO ESPAÇO.** Resistente e impermeável, a cerâmica tem vasta utilização, tanto doméstica quanto industrial. Para obtê-la, é necessário cozinhar a argila (um tipo de barro retirado de depósitos no solo), cuja consistência pastosa permite que seja manipulada à vontade. Depois de molda-

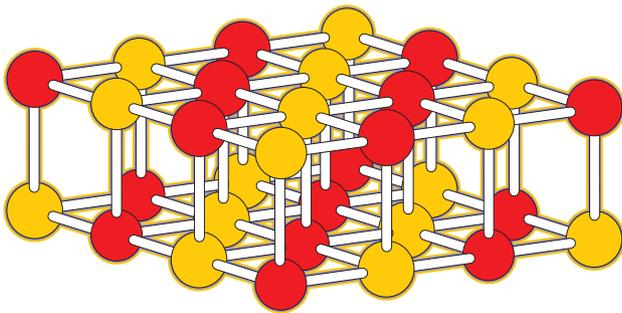


Figura 4. Disposição dos átomos de Mg (magnésio) e O (oxigênio) na superfície de um catalisador de óxido de magnésio (MgO). As esferas amarelas representam o Mg, e as vermelhas representam oxigênio.

da, a peça é colocada num forno para cozinhar, o que solidifica o material e fixa sua forma.

O primeiro cozimento produz uma cerâmica ainda porosa. Para torná-la impermeável, é necessário vitrificar ou esmaltar sua superfície, mergulhando a peça em uma solução de certos óxidos

metálicos em água – e é para a pesquisa destas últimas substâncias que o estudo multidisciplinar de moléculas e superfícies dá sua contribuição. Depois de secar, ela é submetida a um segundo cozimento, que derrete o revestimento e o faz aderir à cerâmica (ver também nesta edição 'A ciência e tecnologia das biocerâmicas').

Porém, entre os fenômenos a que se dedica o estudo de sistemas que envolvem moléculas e superfícies, a catálise talvez seja o de maior importância para a indústria, principalmente para a produção de compostos químicos e de petróleo.

Os catalisadores são substâncias que podem alterar a velocidade de uma reação química e continuar imutáveis. Até astronautas dependem de catalisadores, como a platina, para produzir água no espaço. A maioria dos carros modernos utiliza um conversor catalítico, que transforma gases tóxicos naqueles menos prejudiciais ao meio ambiente e à saúde (figura 4).

Os benefícios das reações catalíticas são bem representados pelos dados de que aproximadamente 90% de todos os produtos químicos sintéticos dependem de catalisadores, que possibilitam a produção em grande escala de produtos para uso diário, como gasolina e outras fontes de energia, fertilizantes, plásticos, detergentes, remédios e alguns alimentos.

De bolas de carbono a moléculas cerebrais, o estudo multidisciplinar de sistemas envolvendo moléculas e superfícies se destaca pela vasta amplitude de campos em que vem atuando. Por sua ampla aplicação industrial, bem como por sua capacidade de desvendar fenômenos de natureza básica, ela já nasceu com a principal característica que deve marcar a física, química e biologia deste novo século: a multidisciplinaridade. ■

## COORDENADOR É ÚNICO COMPONENTE FIXO

O Grupo de Moléculas e Superfícies utiliza o modelo de funcionamento de universidades e centros de excelência internacionais. Em nosso caso, o coordenador do grupo (Carlton A. Taft)

é o único componente fixo e membro do CBPF.

Colaboradores, pós-doutorandos e alunos de pós-graduação têm uma presença física variável na instituição. Conta-

tos diários, no entanto, são mantidos através da Internet, e o acesso à pesquisa se dá através de poderosas estações de trabalho. Essa rotina é complementada por visitas periódicas ao CBPF.